

氏名	新 田 仁
学 位 の 種 類	博 士 ( 理 学 )
学 位 記 番 号	第 3832 号
学位授与年月日	平成12年 9 月29日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当者
学 位 論 文 名	電子格子強結合系に於けるポーラロンの凝縮状態と構造相転移 (Structural phase transition induced by condensation of polarons in strongly coupled electron-phonon systems)
論文審査委員	主 査 教 授 飯田 武      副主査 助教授 坪田 誠 副主査 講 師 鈴木 正人      副主査 教 授 唐沢 力

### 論 文 内 容 の 要 旨

最近、結晶中に注入された電子や正孔の凝縮による超伝導相の出現や、励起子緩和による構造相転移の問題と関連して、電子格子強結合系での電子や正孔の凝縮状態や光生成された励起子の緩和状態が注目されている。本論文では、次の三つのテーマを取り上げ、正孔注入によって引き起こされる相転移の前駆現象や結晶中での励起子状態の詳細を明らかにした。更に、これらの議論から、構造相転移に関連するいくつかの新たな問題を今後の課題として提起した。

#### ( i ) 電子格子強結合系での正孔注入による構造変化

電荷密度波 (CDW) 状態への正孔注入による構造変化の詳細を二次元分子性結晶模型を用いて調べた。その際、電子間相互作用に対しては平均場理論、格子振動に対しては断熱近似を用いた。計算結果から、正孔注入によって引き起こされるCDW-金属転移の直前で、正孔の局在状態と遍歴状態との混在によって、電子格子状態の多重安定性が現れることが示された。また、このような多重安定性の効果を理論に取り込んで正孔対の形成に関する感受率を計算し、正孔対が形成される傾向が多重安定性によって増強されることを示した。これらの結果は、電子格子状態の多重安定性がCDW-金属転移点近傍で現れる超伝導状態での正孔対の形成のメカニズムに対して重要な役割を担っているという結論を導くものである。

#### ( ii ) 正孔注入された半導体メゾスコピック系での構造変化

バルク結晶中に、それとは異なるパイエルスギャップを持つメゾスコピック領域が埋め込まれた半導体のモデルを考え、正孔注入の効果を議論した。様々な正孔濃度に対する電子格子状態の計算から、メゾスコピック系特有の構造変化が存在することを示した。また、メゾスコピック領域とバルクに加えられたバイポーラロンの間に動く相互作用に対する断熱ポテンシャル曲線を求め、このような系での構造変化のメカニズムを解明した。

#### ( iii ) $C_{60}$ 結晶中に生成された励起子状態の解析

$C_{60}$  結晶での励起子状態を議論するために、一光子及び二光子過程の吸収スペクトルの計算を行った。その際、励起子状態は、平均場理論から得られる一電子励起状態間でハミルトニアンを対角化することによって求めた。 $C_{60}$  分子及び結晶での電子状態を決定するため、実験結果を再現するようなスペクトルを理論的に求めた。更に、二光子吸収スペクトルの計算結果より、一光子過程に対して双極子禁制準位である励起子状態の詳細を解明し、結晶の励起子状態に対する分子間相互作用の影響を明らかにした。これらの結果は、 $C_{60}$  結晶での励起子緩和に伴う構造変化のメカニズム解明への基礎を与えるものである。

## 論文審査の結果の要旨

電子格子強結合系では、電子や正孔ポーラロンの凝縮や緩和に起因する基底状態の多重安定性の出現が期待される。光励起や電子又は正孔注入によるこのような多重安定性の出現や、それを前駆現象とする相転移に関する理論的、実験的研究が最近盛んになってきている。

本著者は、電子格子強結合系で、正孔注入によって引き起こされる構造相転移の前駆現象のメカニズムを、バルク系および、バルク・メゾスコピック共存系に於て論じ、以下の諸点を明らかにした。(1) 電子格子強結合系の電荷密度波(CDW)状態に正孔注入したとき、CDW-金属転移の直前の正孔濃度領域で、正孔の局在状態と遍歴状態との混在に起因する系の多重安定性が現れ、それによって正孔対形成が大きく増強されることを見出した。この結果は、電子格子結合状態の多重安定性が、CDW-金属転移近傍で観測されている超伝導状態の出現に重要な役割を担っていることを示している。(2) バルク半導体結晶中に、それとは異なるパイエルスギャップをもつメゾスコピック系が埋め込まれた系での正孔注入効果を調べ、正孔濃度に対して非線形なこの系特有の構造変化が出現すること、およびこれらの微視的メカニズムを解明した。

さらに本論文では、 $C_{60}$ 結晶での励起子緩和に伴う構造変化のメカニズム解明のための基礎的研究を行っている。本著者は、平均場理論から得られる一電子励起状態を基底として、多体系のハミルトニアンを対角化することにより励起子状態を解析した。また、一光子、二光子光学スペクトルを理論的に求め、実験結果との比較から、この系の励起状態に関する基礎的情報を得ている。これを基礎とした励起子緩和機構解明への発展が期待される。

以上の結果は、電子格子強結合系に於ける構造相転移の研究に新たな知見をもたらすものであり、本論文は博士(理学)の学位を授与するに値するものと審査した。